

Структура полученных соединений подтверждена данными ИК, масс-спектрометрии.

1. Осянин В.А., Пурьгин П.П., Белоусова З.П. Синтез 1*H*-азол-1-илметилфенолов и их гликозилирование. // Здравоохранение Башкортостана. 2002. № 2. С. 126.

МОДЕЛЬ ПРОГНОЗА УЛЬЦЕРОГЕННОГО ДЕЙСТВИЯ НЕСТЕРОИДНЫХ ПРОТИВОВОСПАЛИТЕЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ

^aМухаметов А.Д., ^aХайруллина В.Р., ^aГарифуллина Г.Г., ^aГерчиков А.Я.,
^bТюрина Л.А., ^cЗарудий Ф.С.

^aБашкирский государственный университет, Уфа

^bУфимский государственный нефтяной технический университет

^cИнститут органической химии Уфимского научного центра РАН

Известно, что механизм действия нестероидных противовоспалительных препаратов (НПВП) обусловлен ингибированием фермента циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2). Побочное же действие обусловлено ингибированием его изоформы - фермента циклооксигеназы-1 (ЦОГ-1). С другой стороны, возникновение ulcerогенного эффекта от применения НПВП тесно связано с их строением и обусловлено наличием в структуре этих соединений определённых функциональных групп. Таким образом, исследование взаимосвязей «структура – свойство» открывает широкие перспективы для использования методов теории распознавания образов в разработке НПВП с низким уровнем токсического действия.

Изучение связи «структура – ulcerогенный эффект» в ряду клинически используемых НПВП проведено с помощью компьютерной системы SARD-21 (Structure Activity Relationship & Design). На основе этой взаимосвязи разработана математическая модель, позволяющая прогнозировать возникновение ulcerогенного эффекта, обусловленное применением НПВП. Для формирования модели использована обучающая выборка, состоящая из 156 соединений: 75 неселективных НПВП (класс активных соединений) и 81 высокоселективного ингибитора ЦОГ-2 (класс неактивных соединений). В рамках процедур используемой программы выявлены структурные фрагменты (монады, диады, триады), характерные для низкотоксичных НПВП. Определен решающий набор признаков (РНП), определяющих вероятность возникновения ulcerогенного действия НПВП. Тестирование полученного РНП на экзаменационной выборке, состоящей из 48 соединений с известным уровнем ulcerогенного эффекта показало 87.5% уровень достоверного распознавания.